# Квантово-механические аспекты резонансной теории Л. Полинга.

Безверхний Владимир Дмитриевич, Безверхний Виталий Владимирович.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

**Резюме:** Резонансная теория Л. Полинга проанализирована с использованием принципа квантовой суперпозиции, то есть, принципа суперпозиции волновой функции, являющегося основным положительным принципом квантовой механики. Принцип квантовой суперпозиции по существу является основным свойством волновой функции. На примере молекулы бензола показано, что принцип квантовой суперпозиции, а значит, и квантовая механика в целом находятся в непреодолимом противоречии с теорией резонанса.

**Ключевые слова:** резонансная теория Л. Полинга, бензол, принцип квантовой суперпозиции, квантовая механика, суперпозиция волновых функций, волновая функция.

## ВВЕДЕНИЕ.

Основу математического аппарата квантовой механики составляет утверждение, что состояние квантовой системы может быть описано некоторой функцией координат $\psi(q)$, называемой волновой функцией (квадрат модуля этой функции определяет распределение вероятностей значений координат) [1]. В резонансной теории Л. Полинга [2, 3] волновая функция $\psi$ используется для описания распределения электронов в молекулах и особенно показателен пример молекулы бензола. Поэтому резонансную теорию (на примере молекулы бензола) можно анализировать с точки зрения квантовой механики, используя принцип квантовой суперпозиции.

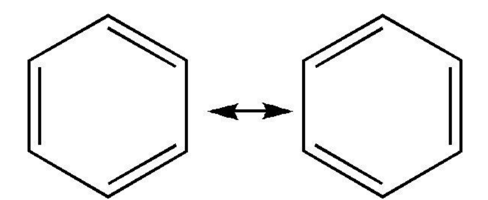
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ.

Например, рассмотрим два квантовых состояния (реально существующих), описываемых волновыми функциями $\psi1$ и $\psi2$. Из принципа суперпозиции [1, с. 21] следует, что их линейная комбинация ($\psi3 = C1\psi1 + C2\psi2$) будет третьим квантовым состоянием (тоже реально существующим), которое будет описываться волновой функцией $\psi3$. Что это значит? Дело в том, что измерение некоторой физической величины d в состоянии $|\psi1\rangle$ даст d1, а измерение значения d в

состоянии $|\psi2>$ даст d2. Когда реализуется третье квантовое состояние $|\psi3>$, то при измерении физической величины квантовая система будет принимать значения d1 и d2 с вероятностями соответственно $|C1|^2$ и $|C2|^2$. То есть, в квантовом состоянии $|\psi3>$, когда у нас будет много измерений, мы получим иногда значение d1, а иногда d2 (с определенной известной частотой). Но, именно этого в теории резонанса быть не может.

Для простоты и удобства рассмотрим резонанс только двух структур Кекуле (резонансные структуры), исключая структуры Дьюара. Тогда в теории резонанса предполагается, что $|\psi1>$ — это квантовое состояние 1, которое описывает резонансную структуру 1, а $|\psi2>$ — это квантовое состояние 2, которое описывает резонансную структуру 2.

Волновые функции $\psi1$ и $\psi2$ для резонансных структур 1 и 2 (структуры Кекуле):



Линейная комбинация ($\psi3 = C1\psi1 + C2\psi2$) представляет собой третье квантовое состояние $|\psi3>$, которое описывается волновой функцией $\psi3$ и будет описывать реальную молекулу бензола (резонансный гибрид). Коэффициенты C1 и C2 будут определять вклады резонансных структур (структуры Кекуле, для нашего случая $C1/C2 = 1$, $|C1|^2 = |C2|^2 = 0{,}5$) в реальной молекуле бензола (резонансный гибрид), которая не может быть описана отдельными резонансными структурами. Важно отметить, что молекула бензола действительно реальна и уникальна, и она не может иметь дискретного описания. То есть, при измерениях мы никогда не «увидим» то одну молекулу Кекуле (резонансная структура 1), то другую (резонансная структура 2) - а это прямо противоречит принципу квантовой суперпозиции. Более того, принятые в теории резонанса структуры Кекуле (резонансные структуры), являются идеальными структурами, которых в действительности не существует, поскольку у них все связи равны, и это несмотря на чередование одинарных и двойных С—С связей, которые в реальности имеют разную длину. Поэтому, принцип квантовой суперпозиции (для теории резонанса) не выполняется даже для квантовых состояний $|\psi1>$ и $|\psi2>$,

поскольку резонансные структуры не являются реальными, и никакую физическую величину (реальную) мы не сможем измерить.

Если же в качестве резонансных структур взять настоящие «искривленные» структуры Кекуле с разной длиной связей, то резонансная теория не имеет смысла, так как при переходе от одной структуры к другой должны изменятся межъядерные расстояния. Но, тогда ко всем трем квантовым состояниям применим принцип квантовой суперпозиции (для $|\psi1>$ и $|\psi2>$ это очевидно, а для $|\psi3>$ будет сначала одна «искривленная» структура Кекуле, затем другая, и т.п., вклад 50 : 50). Фактически длины связей не изменяются, поэтому для химии это неприменимо.

Особо отметим, что резонансные структуры (структуры Кекуле с одинаковыми С-С связями) не являются электронными таутомерами. Молекула реального бензола уникальна и никакой таутомерии не существует. Неверно представлять молекулу бензола в виде переходов между электронными таутомерами (электроны в бензоле не мигрируют от одной связи к другой). Существует единая молекула бензола, которая имеет постоянное распределение электронов во времени и не может быть представлена дискретным описанием. Поэтому, в теории резонанса принято, что каждая резонансная структура вносит определенный вклад в реальную молекулу (резонансный гибрид) (обычно химики определяли вклад «на глаз»). А третье квантовое состояние $|\psi3>$ описывает реальную молекулу бензола, которая представляет собой нечто среднее между резонансными структурами (вспомним вклад каждой резонансной структуры в реальную структуру (резонансный гибрид)).

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ.**

На примере молекулы бензола показано, что принцип квантовой суперпозиции, а значит, и квантовая механика в целом находятся в непреодолимом противоречии с теорией резонанса. Поэтому, предположение о том, что реальная молекула бензола (резонансный гибрид), представляет собой нечто среднее между резонансными структурами, является гениальным химическим предположением, хотя и не строгим с точки зрения квантовой механики, но позволившим качественно и количественно описать молекулу бензола, которая не может быть представлена одной формулой. Этот пример наглядно показывает, что в фундаментальных вопросах химия не сводится к

физике, здесь есть своя «химическая» изюминка. И тем не менее, та же теория резонанса Л. Полинга буквально изменила химию, оказала глубокое влияние на умы химиков (я уже не говорю о педагогическом воздействии теории резонанса), и уже давно нет учебников по органической химии, где нет теории резонанса. Тем не менее, следует отметить, что при усложнении молекулы (пиридин, нафталин, антрацен и т. д.) количественные расчеты усложняются (для правильного расчета нафталина необходимо учитывать около 40 резонансных структур) и поэтому стали использовать метод МО.

**ЛИТЕРАТУРА.**

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика в 10 томах. Том 3. Квантовая механика. Четвертое издание. М.: Наука, 1989, стр. 19 - 21. ISBN 5-02-014421-5 (Том 3).

2. Полинг Л. Природа химической связи. Перевод с английского М. Е. Дяткиной. Проф. Я. К. Сыркин. М.; Л.: Госхимиздат, 1947, стр. 413, 128 - 157, 408 - 416.

3. Марч Дж. Органическая химия. Реакции, механизмы и структура. В 4-х томах. Мир, Москва, 1987 год. Том 1, стр. 47 - 49 (русский перевод с Advanced organic chemistry. Reactions, Mechanisms, and Structure. Third edition. Jerry March, Professor of Chemistry Adelphi University. New York, 1985).